非平衡定常状態の非線形応答関数の普遍的性質(非平衡系の物理-非平衡ゆらぎと集団挙動-,研究会報告)

清水, 明; 弓削, 達郎

非平衡定常状態の非線形応答関数の普遍的性質

東京大学大学院 総合文化研究科 広域科学専攻 相関基礎科学系　清水明 [1]
東北大学 国際高等研究教育機構　弓削 達郎[2]

1 はじめに

よく知られているように、**平衡**状態に弱い外場をかけたときの1次の応答を記述する、**平衡状態の線形応答関数**には、広範囲の系で成り立つ普遍的な性質がある [1, 2]。線形非平衡統計力学の主要な結果は、全てこれらから導けるので、久保が言っているように、これらはまさに、線形非平衡統計力学の核心である。

しかし、これらの普遍的な性質は、**非平衡**状態に弱い外場をかけたときの1次の応答を記述する、**非平衡状態の線形応答関数**では、一般には失われるであろうことも、知られて、あるいは予想されていた。しかし、本当に全ての性質が破綻するのかどうか（一部は生き残るのか）とか、破綻したとしても、拡張した形では成り立つのではないか、等の、根本的で重要な問の答えは、長い間分からないままであった。

我々は最近、この根本的な問に答えることに成功した [3, 4, 5]。すなわち、平衡状態の線形応答関数の普遍的性質のうちの一部は、**非平衡定常状態 (NESS) に弱い外場をかけたときの1次の応答**を記述する、**非平衡定常状態の線形応答関数**でも、そのまま、あるいは、拡張した形で、やはり普遍的に成り立つことを見いだした。

我々はさらに、これらの結果を、**非平衡定常状態に弱い外場をかけたときの2次以上の応答**を記述する、**非平衡定常状態の非線形応答関数**にまで拡張することに成功した [6]。本稿では、これについて概略を説明する（詳しくは、文献 [6] を参照されたい）。特に重要な結果は、複数の独立な実験結果に対する予言である、応答関数の総和則と漸近的振舞いである。

2 状況設定と応答関数の定義

ポンプ場 F（着目系を非平衡定常状態に駆動する外場）に加えて時間に依存する弱い**プローブ場** $f_1(t), f_2(t), \cdots, f_m(t)$ $(\equiv \boldsymbol{f}(t))$ を $t \geq t_0$ で着目系に掛けた状況を考える。ただし、$t_{\rm in} < t_0 \leq t < t_{\rm out}$ である（$[t_{\rm in}, t_{\rm out}]$ はプローブ場がない場合に着目系が定常状態になっている時間領域）。プローブ場の数 m は任意でよい。

[1] E-mail: shmz@ASone.c.u-tokyo.ac.jp
[2] E-mail: yuge@m.tohoku.ac.jp

NESS の $\boldsymbol{f}(t)$ に対する応答、特に着目系の**マクロ変数** A に関する応答

$$\Delta A(t) \equiv \langle A \rangle_{F+\boldsymbol{f}}^{t} - \langle A \rangle_{F}, \tag{1}$$

について考える。NESS がプローブ場に対して安定であるとすると、$\Delta A(t)$ は $\boldsymbol{f}$ のベキ (F のベキではない) に展開できる：$\Delta A(t) = A^{(1)}(t) + A^{(2)}(t) + \cdots$. このとき、$n$ 次の応答は現象論的に

$$\Delta A^{(n)}(t) = \frac{1}{n!}\sum_{\alpha_1=1}^{m}\cdots\sum_{\alpha_n=1}^{m}\int_{t_0}^{t} dt_1 \cdots \int_{t_0}^{t} dt_n \Phi^{(n)F}_{\alpha_1\cdots\alpha_n}(t-t_1,\cdots,t-t_n) f_{\alpha_1}(t_1)\cdots f_{\alpha_n}(t_n), \tag{2}$$

と表せる。NESS の **$\boldsymbol{n}$ 次の応答関数** $\Phi^{(n)F}$ は上式と因果律

$$\Phi^{(n)F}_{\alpha_1\cdots\alpha_n}(\tau_1,\cdots,\tau_n) = 0 \text{ if either one of } \tau_j\text{'s} < 0, \tag{3}$$

そして、$\Phi^{(n)F}_{\alpha_1\cdots\alpha_n}(\tau_1,\cdots,\tau_n)$ は $\alpha_1\tau_1,\cdots,\alpha_n\tau_n$ の入れ換えに対して不変であるという（任意性を取り除くための）要求によって定義される。

実験ではプローブ場の時間依存性を正弦波的なものにすることが多い;

$$f_\alpha(t) = f_\alpha^{+} e^{-i\omega_\alpha t} + f_\alpha^{-} e^{+i\omega_\alpha t} = \sum_{\sigma=\pm 1} f_\alpha^{\sigma} e^{-i\sigma\omega_\alpha t}. \tag{4}$$

ただし、$(f_\alpha^{-})^* = f_\alpha^{+}$. このとき、$n$ 次応答は式 (2) より、

$$\Delta A^{(n)}(t) = \frac{1}{n!}\sum_{\alpha_1,\sigma_1}\cdots\sum_{\alpha_n,\sigma_n} \Xi^{(n)F}_{\alpha_1\cdots\alpha_n}(\sigma_1\omega_{\alpha_1},\cdots,\sigma_n\omega_{\alpha_n}) f_{\alpha_1}^{\sigma_1}\cdots f_{\alpha_n}^{\sigma_n}\, e^{-i\left(\sigma_1\omega_{\alpha_1}+\cdots+\sigma_n\omega_{\alpha_n}\right)t}, \tag{5}$$

となる。ここで、$\Xi^{(n)F}$ は $\Phi^{(n)F}$ の Fourier 変換である;

$$\Xi^{(n)F}_{\alpha_1\cdots\alpha_n}(\sigma_1\omega_{\alpha_1},\cdots,\sigma_n\omega_{\alpha_n}) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau_1 \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau_n\ \Phi^{(n)F}_{\alpha_1\cdots\alpha_n}(\tau_1,\cdots,\tau_n) e^{i\sum_{j=1}^{n}\sigma_j\omega_{\alpha_j}\tau_j}. \tag{6}$$

3 「普遍的性質」には 2 種類ある

$\Xi^{(n)F}$ の「普遍的性質」には、次の 2 種類があることを認識することは重要である。

(i) Properties of Fourier transforms of *every* causal functions (see, e.g., [7])

これは、$\Xi^{(n)F}$ に特徴的な性質は何ら含んでいないので、非平衡統計力学として興味がある情報は含んでいない。これに分類されるのは、因果律だけから導ける dispersion relations

$$\Xi^{(n)F}_{\alpha_1\cdots\alpha_n}(\sigma_1\omega_{\alpha_1},\sigma_2\omega_{\alpha_2},\cdots,\sigma_n\omega_{\alpha_n}) = \frac{-i}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathcal{P}}{\omega' - \sigma_1\omega_{\alpha_1}} \Xi^{(n)F}_{\alpha_1\cdots\alpha_n}(\omega',\sigma_2\omega_{\alpha_2},\cdots,\sigma_n\omega_{\alpha_n}) d\omega,' \tag{7}$$

（この実部と虚部をとると、見慣れた形になる）や、いわゆる「moment sum rules」[3]がある。それでも前者はときには有用であるが、後者は、たとえば $n=1$ の場合の最低次では、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{Re}\,\Xi^F(\omega)\frac{d\omega}{\pi} = \lim_{\omega\to\infty} \omega\,\mathrm{Im}\,\Xi^F(\omega) = \kappa : \text{ indep't of } \omega. \tag{8}$$

[3]残念ながら呼び名は様々であるので、ここではこう呼んでおく。

のような関係式であるが、「定数」と称する κ は、ω に依存しないという以外には、何も分からない。例えば、非平衡統計力学として最も興味があるのは、κ が非平衡度でどのように変わるか（あるいは変わらないのか）であるが、それには全く答えられない。

(ii) Universal properties specific to $\Xi^{(n)F}$

これこそが、非平衡統計力学として最も興味がある対象である。それは、必然的に、ミクロな物理学と結びつく。その結果、例えば、上記の「moment sum rule」の未知の「定数」κ の値をきちんと与え、それが非平衡度とどう関係するかも明らかにすることができる。

本稿で論ずるのは、もちろん (ii) のタイプである。

4 結果

一つ目の（(ii) のタイプの）普遍的性質は次式で表される $\mathrm{Re}\,\Xi^{(n)F}$ **に対する総和則**である;

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega_1}{\pi}\cdots\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega_n}{\pi}\,\mathrm{Re}\,\Xi^{(n)F}_{\alpha_1\cdots\alpha_n}(\sigma_1\omega_1,\cdots,\sigma_n\omega_n)=\frac{\mathcal{S}_{\boldsymbol{\alpha}}}{(i\hbar)^n}\left\langle\hat{B}^{\times}_{\alpha_n}\cdots\hat{B}^{\times}_{\alpha_1}\hat{A}\right\rangle_F. \tag{9}$$

これは NESS が安定であれば**どんなに強い F であっても成り立つ**。また、任意の $\sigma_1,\cdots,\sigma_n$ で成り立つ。ここで、$\langle\cdot\rangle_F\equiv\mathrm{Tr}\,(\hat{\rho}_F\,\cdot\,)$ は着目系の NESS における期待値を表す。

また、$\mathrm{Im}\,\Xi^{(n)F}$ **に対する総和則**も成り立つ;

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega_j}{\pi}\left[\sigma_j\omega_j\left(\prod_{k\ (\neq j)}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega_k}{\pi}\right)\mathrm{Im}\,\Xi^{(n)F}_{\alpha_1\cdots\alpha_n}(\sigma_1\omega_1,\cdots,\sigma_n\omega_n)-\frac{\mathcal{S}_{\boldsymbol{\alpha}}}{(i\hbar)^n}\left\langle\hat{B}^{\times}_{\alpha_n}\cdots\hat{B}^{\times}_{\alpha_1}\hat{A}\right\rangle_F\right]$$
$$=-\frac{\mathcal{S}_{\boldsymbol{\alpha}}}{(i\hbar)^n}\left\langle\hat{B}^{\times}_{\alpha_n}\cdots\dot{\hat{B}}_{\alpha_j}(0)^{\times}\cdots\hat{B}^{\times}_{\alpha_1}\hat{A}\right\rangle_F, \tag{10}$$

これも（NESS が安定であれば）**どんなに強い F であっても成り立つ**。また、任意の $j\ (=1,2,\cdots,n)$ および $\sigma_1,\cdots,\sigma_n$ で成り立つ。

さらに、上記の総和則から次のように $\Xi^{(n)F}$ **に対する漸近的振舞い**も得られる。$\mathrm{Re}\,\Xi^{(n)F}$ は式 (9) の積分が収束するためには大きな $\omega_1,\omega_2,\cdots$ で十分速く減衰しなければならない。また、$\mathrm{Im}\,\Xi^{(n)F}$ は式 (10) の積分が収束するためには大きな $\omega_j\ (j=1,2,\cdots,n)$ で

$$\lim_{\omega_j\to\infty}\omega_j\left(\prod_{k\ (\neq j)}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega_k}{\pi}\right)\mathrm{Im}\,\Xi^{(n)F}_{\alpha_1\cdots\alpha_n}(\sigma_1\omega_1,\cdots,\sigma_n\omega_n)=\frac{1}{\sigma_j}\frac{\mathcal{S}_{\boldsymbol{\alpha}}}{(i\hbar)^n}\left\langle\hat{B}^{\times}_{\alpha_n}\cdots\hat{B}^{\times}_{\alpha_1}\hat{A}\right\rangle_F \tag{11}$$

のような振舞いを示さなければならない。これも（NESS が安定であれば）**どんなに強い F であっても成り立つ**。また、任意の $j\ (=1,2,\cdots,n)$ および $\sigma_1,\cdots,\sigma_n$ で成り立つ。

5 意味・意義・応用

上記の総和則は $\Phi^{(n)F}$ の $\tau_j\to+0$ に関する予言というより、（ある有限区間の）多くの振動数 ω における $\Xi^{(n)F}$ に関する予言と見るべきである。というのは、前者（プローブをかけた直後の応答）を実験的に測定することは非常に難しいが、後者の測定は容易だからである。

また、総和則や漸近的振舞いは**着目系（およびその境界）の物理量のみ**（つまり、$\hat{A}, \hat{B}_{\alpha_1}, \cdots, \hat{B}_{\alpha_n}$, $\hat{\rho}_F$ および $\dot{\hat{B}}_{\alpha_j}(0)$）を含んだものになっている。この中で $\hat{\rho}_F$ 以外の演算子は既知のものなので、関係式に現れるこれら演算子の組合せの非平衡状態での期待値は実験的に容易に測定できる。例えば、$\left\langle \hat{B}^{\times}_{\alpha_n} \cdots \hat{B}^{\times}_{\alpha_1} \hat{A} \right\rangle_F$ は $\hat{B}^{\times}_{\alpha_n} \cdots \hat{B}^{\times}_{\alpha_1} \hat{A}$ という物理量（後で見るようにこれは多くの場合簡単な物理量になる）を**プローブ場を掛けていないときの** NESS で測れば求まる。一方、$\Xi^{(n)F}$ は様々な振動数のプローブ場 $f(t)$ を掛けたときの応答を測定すれば求まる。従って、**これらの普遍的関係式に現れる全ての項は実験的に容易に測れるものである**。また、これらの関係式は**複数の独立した実験**（例えば、プローブ場あり/なしでの実験）に対する予言となっている。

典型的な例として、$\hat{A}$ が運動量（もしくは位置）の l_A 次の多項式であり、$\hat{B}_{\alpha_j}$ $(j = 1, \cdots n)$ が位置（もしくは運動量）の l_B 次の多項式である場合を考える。このとき、$\hat{B}^{\times}_{\alpha_n} \cdots \hat{B}^{\times}_{\alpha_1} \hat{A}$ は位置と運動量の $[(l_B - 2)n + l_A]$ 次の多項式になる。特に $l_B = 1$ のときは、高次の n になるほど多項式の次数は小さくなり、$n > l_A$ ではゼロになる。よって、**$l_B = 1$ のとき、式 (9) の総和の値と式 (11) の漸近値は $n \geq l_A$ では F に依存しない**、という（驚くべき）結論を得る。

これらの結果は熱浴等の環境を含んだ巨大な Hmiltonian 系を用い、着目系の NESS の安定性のみを仮定して得られたものである（結果は着目系の物理量のみの間の関係式になっている）。（環境等の自由度を縮約するなどしたとき）着目系の運動は確率過程などの non-Hamiltonian モデルで記述されることがあるが、そのような場合でも全系として（環境等の自由度をあらわに取り込んで）十分大きな系を取れば Hamiltonian 系として記述できる。よって、**我々の結果の適用範囲は非常に広範囲にわたるものであり**、電気伝導体、光学物質、磁性体などに、しかも**たとえそれらが強いエネルギー散逸を起こす環境に浸っていたとしても**、適用できる。従って、（平衡状態の応答関数の普遍的性質が線形非平衡領域の物理のの基礎となった [2] のと同様に）これらの結果は NESS に関する非線形統計力学・凝縮系物理学の基礎となり得るものである。

実験的には、本稿の結果は、$\Xi^{(n)F}$ を広い周波数範囲にわたって測定することで検証できる。あるいは、$n = 1$ の場合について Ref. [3] で行ったように、分子動力学シミュレーションによって検証することもできる。

逆に、本稿の結果と照らし合わせることによって、実験や理論計算の結果の正誤をチェックすることもできる。これはちょうど、電荷保存則を満たしているかどうかで実験や理論計算の結果の正誤をチェックするのと同様である。

さらに、Eq. (9) の右辺の値を知りたいときに、それを左辺の値を測ることで知ることもできる。これは、右辺の量が、重要だが直接測定が難しいような物理量であるときに、特に有効な手段であり、相互作用の強い非自明な系の探索に有用である [8]。

最後に：本稿および文献 [3, 4, 5] では、静的なポンプにより駆動されている定常な非平衡状態 (NESS) を考え、そこに動的なプローブを加えたときの応答関数の普遍的性質を論じた。最近我々は、これらの結果を、動的なポンプにより駆動されている時間変化する非平衡状態に拡張し、そこに動的なプローブを加えたときの応答関数の普遍的性質を導くことにも成功した [8]。これにより、非線形光学の典型的な実験などにも適用できるような、さらに応用範囲が広い理論が構築できた。

This work was supported by KAKENHI No. 22540407 and the Grant-in-Aid for the GCOE Program "Weaving Science Web beyond Particle-Matter Hierarchy".

参考文献

[1] R. Kubo, J. Phys. Soc. Jpn. **12**, 570 (1957).

[2] 久保 他、統計物理学 岩波講座 現代物理学の基礎 [第 2 版]（岩波書店、1978）.

[3] A. Shimizu and T. Yuge, J. Phys. Soc. Jpn. **79**, 013002 (2010).

[4] T. Yuge, Phys. Rev. E **82**, 051130 (2010).

[5] 弓削達郎、清水明、物性研究、本特集号。

[6] A. Shimizu, J. Phys. Soc. Jpn. **79**, 113001 (2010).

[7] V. Lucarini, J. Stat. Phys. **131** (2008) 543.

[8] A. Shimizu and T. Yuge, in preparation.